



PROFQUI
PROGRAMA DE MESTRADO
PROFISSIONAL EM QUÍMICA
EM REDE NACIONAL

A HISTÓRIA DA LIGAÇÃO QUÍMICA: DO EMPÍRICO À TEORIA QUÂNTICA

Ronald Silva dos Prazeres

Prof. Dr. Luciano de Azevedo Soares Neto

SUMÁRIO

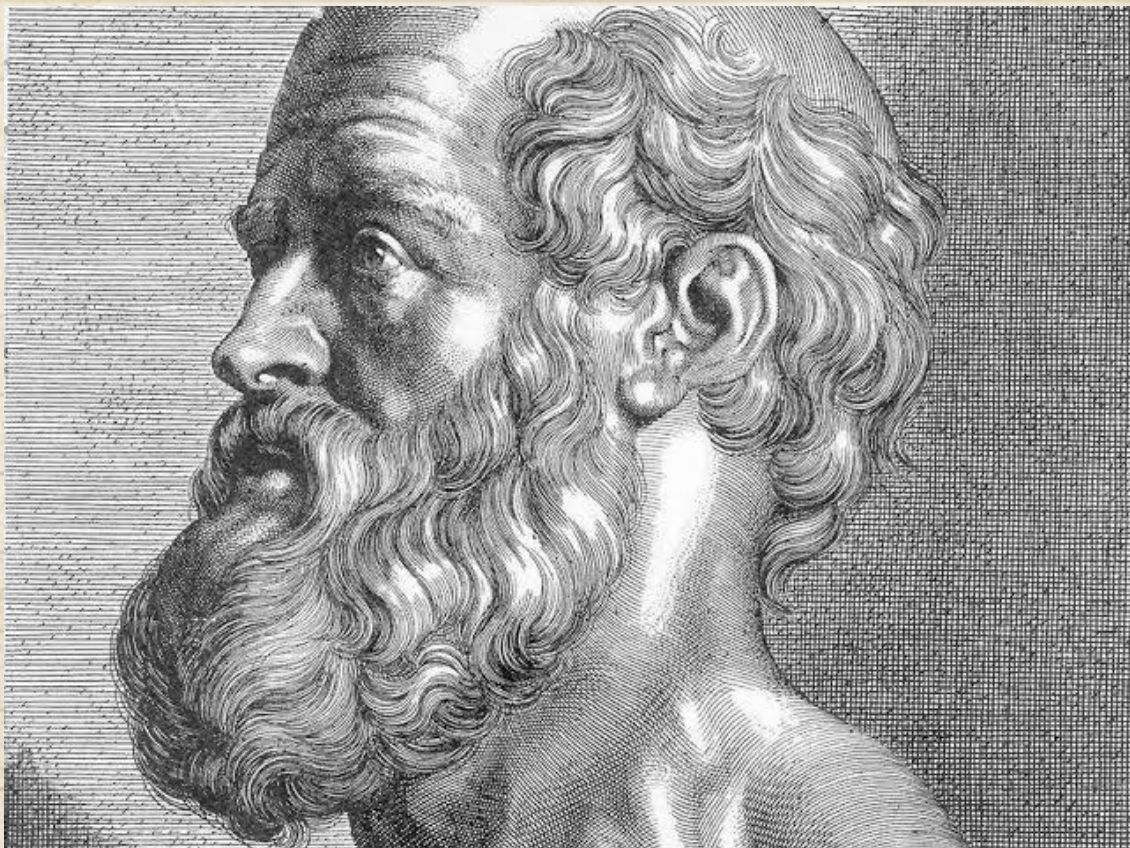
1 - Introdução.....	3
2 - As Teorias de Ligações Químicas.....	8
2.1 - Aspectos Históricos.....	8
2.2 - Teoria Eletroquímica da Ligação Química (Teoria Dualística)..	10
2.3 - Teoria Positivo-negativa.....	12
2.4 - Teoria da Ligação de Lewis (Teoria do Par Eletrônico).....	17
2.5 - Teoria da Repulsão dos Pares de Elétrons Livres (Modelo VSEPR).....	26
2.6 - Teoria da Ligação de Valência (TLV).....	31
2.7 - Teoria dos Orbitais Moleculares (TOM).....	37
2.8 - Teoria do Loge.....	43
Referências.....	48

1 - Introdução

As tentativas mais antigas para explicar as interações entre as substâncias podem ser encontradas com os filósofos gregos Empédocles e Hipócrates (séc. V a.C.). Eles atribuíam sentimentos como amor e ódio aos elementos, como se os átomos fossem seres humanos e acreditavam que a atração ou repulsão das substâncias estavam relacionadas a estes sentimentos. Já no período alquimista, acreditava-se que as interações dos elementos ocorriam pelas semelhanças entre eles e não porque possuíam sentimentos (JUSTI, 1998).

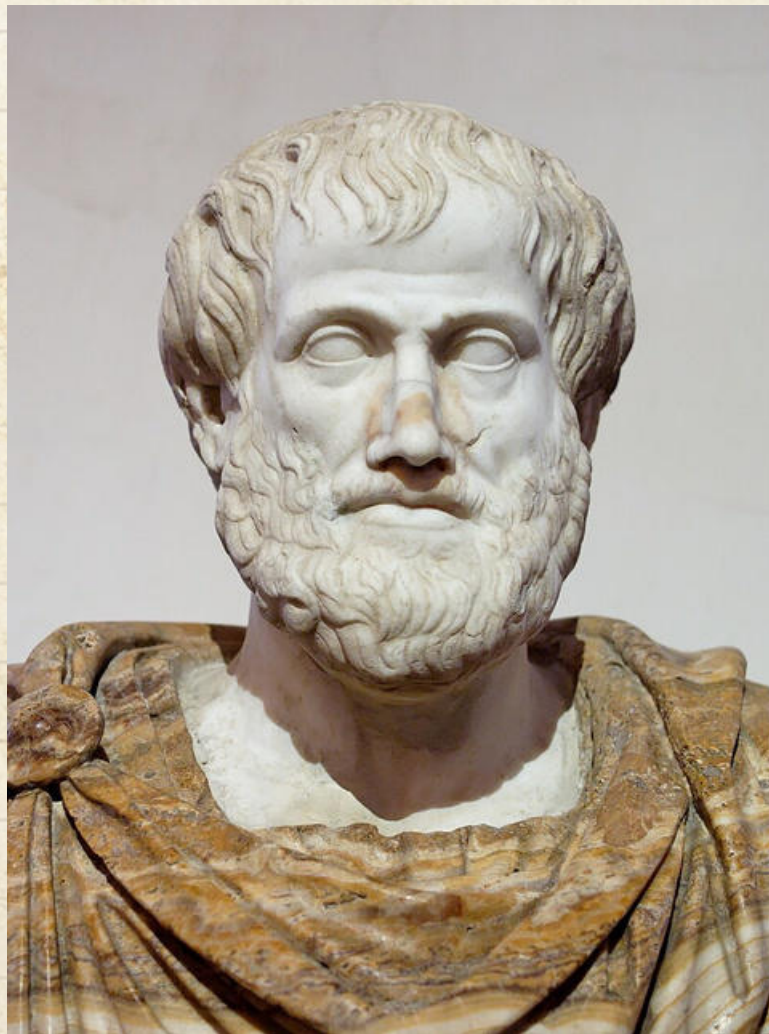


Filósofo grego Empédocles.



Filósofo grego Hipócrates.

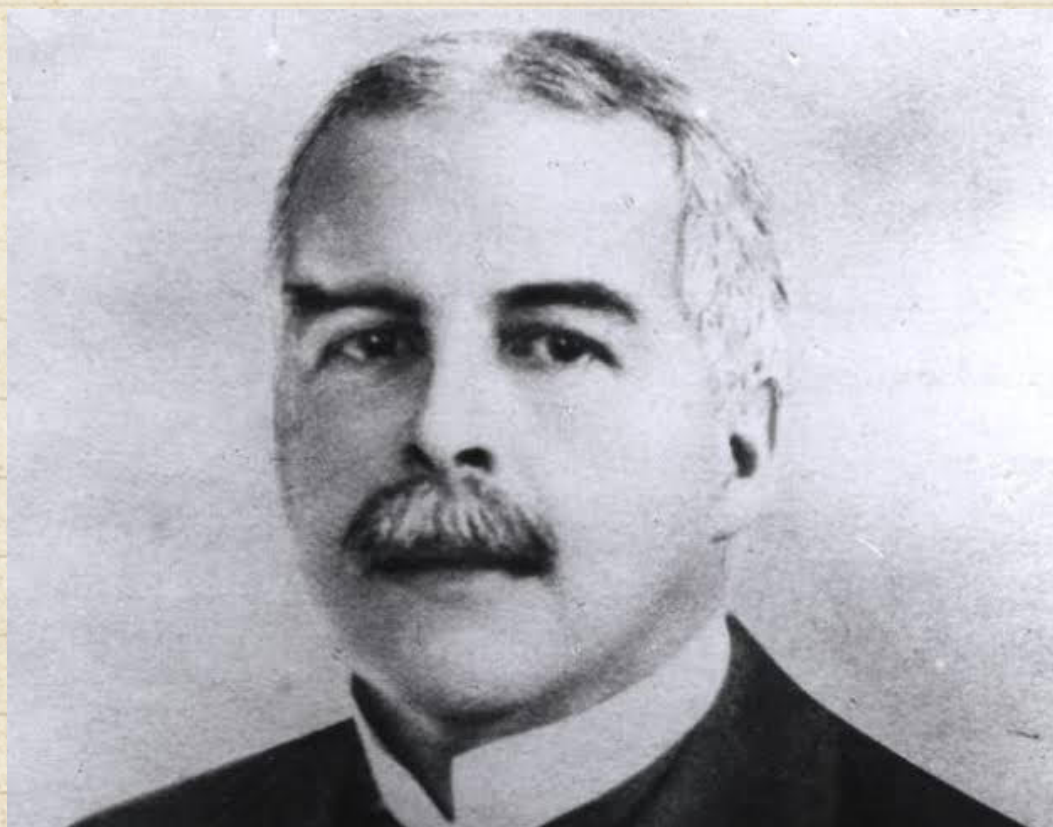
No século posterior, Aristóteles (séc. IV a.C.) também cita fatores que podem influenciar a ocorrência de transformações, evidenciando afinidades e diferenças entre as substâncias. Estas ideias sobre afinidade entre os átomos influenciaram o pensamento de muitos cientistas até o século XVII, passando pelo período da alquimia com certa atenção às transformações e formação de substâncias, mostrando alguns registros de que as substâncias não se combinavam devido a sentimentos, mas por causa de suas semelhanças (JUSTI, 1998).



Filósofo grego Aristóteles.

A expressão ligação química surgiu apenas na segunda metade do século XIX, contudo, desde a Antiguidade evidenciam-se ideias sobre a transformação da matéria (ABRANTES, 1998; BENSAUDE-VINCENT; STENGERS, 1992).

Nos livros didáticos, Gilbert Newton Lewis (1875-1946) é apresentado como o primeiro cientista a propor uma teoria sobre a ligação química para explicar a interação dos átomos resultando na formação de composto. No entanto, antes de Lewis, outros químicos propuseram ideias sobre as ligações químicas, mas não aparecem na grande maioria dos livros didáticos (FILGUEIRAS, 2016).



Físico e químico estadunidense Gilbert Newton Lewis.

2 - As Teorias de Ligações Químicas

2.1 - Aspectos Históricos

No período alquimista, acreditava-se que as interações dos elementos ocorriam pelas semelhanças entre eles e não porque possuíam sentimentos (JUSTI, 1998).

No século posterior, Aristóteles (séc. IV a.C.) também cita fatores que podem influenciar a ocorrência de transformações, evidenciando afinidades e diferenças entre as substâncias. Estas ideias sobre afinidade entre os átomos influenciaram o pensamento de muitos cientistas até o século XVII, passando pelo período da alquimia com certa atenção às transformações e formação de substâncias, mostrando alguns registros de que as substâncias não se combinavam devido a sentimentos, mas por causa de suas semelhanças (JUSTI, 1998).

A expressão ligação química surgiu apenas na segunda metade do século XIX, contudo, desde a Antiguidade evidenciam-se ideias sobre a transformação da matéria (ABRANTES, 1998; BENSAUDE-VINCENT; STENGERS, 1992).

2.2 - Teoria Eletroquímica da Ligação Química (Teoria Dualística)

As primeiras ideias de que as ligações químicas tinham natureza elétrica e surgiram dos experimentos de William Nicholson (1753-1815) e Anthony Carlisle (1768-1840), que realizaram a eletrólise da água, conseguindo separá-la em hidrogênio e oxigênio. Em 1811, o químico sueco Jöns Jakob Berzelius (1779-1848) desenvolveu uma teoria de atração elétrica, sugerindo que cada átomo possuía um ou mais polos elétricos com cargas positivas e negativas em lados opostos, similares aos polos de um ímã. A atração entre átomos ocorria devido à neutralização das cargas elétricas opostas (BEZERRA; SILVA, 2001).

Então, em 1818, Berzelius desenvolveu a teoria eletroquímica da ligação (ou teoria dualística). Segundo ela, todos os átomos eram positiva ou negativamente carregados. Os átomos positivos repeliam os positivos e os negativos repeliam os negativos. A combinação só ocorria entre átomos positivos e negativos. Assim, esta primeira teoria da ligação química foi inicialmente aceita por físicos e químicos e se ajustava perfeitamente aos compostos da química mineral (BEZERRA; SILVA, 2001).

2.3 - Teoria Positivo-negativa

Em 1897, Joseph John Thomson (1856–1940), físico que dirigiu o importante laboratório Cavendish na Universidade de Cambridge, na Inglaterra, apresentou em sua pesquisa a presença de partículas negativas nos átomos – os elétrons. Na teoria proposta por Thomson, o elétron seria o responsável pela atração elétrica entre os átomos (BEZERRA; SILVA, 2001).



Físico britânico Joseph John Thomson.

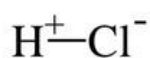
Thomson afirmava que a atração entre dois átomos resultava sempre que um dos átomos doava um elétron para o outro. Assim, o átomo que recebeu o elétron ficaria negativamente carregado e o átomo que perdeu o elétron ficaria com uma carga resultante positiva. Então, os dois átomos teriam cargas opostas e se atraíam. Em 1903, Johannes Stark (1874-1957) sugestionou que a união entre átomos seria resultado do compartilhamento de um elétron por um par de átomos em uma molécula (BEZERRA; SILVA, 2001).

Em 1904, na Alemanha, o químico Richard Abegg (1869-1910) desenvolveu, uma teoria eletrostática para a ligação química idêntica à de Thomson. Porém, sua “regra do octeto” trazia indicação do número máximo de elétrons envolvidos em uma ligação. Abegg verificou que um mesmo átomo tinha carga positiva ou carga negativa em diferentes compostos e que o somatório do módulo destas cargas muitas vezes era oito. Exemplo: cloro com carga -1 no cloreto de sódio (NaCl) e carga +7 no ácido perclórico (HClO₄); o somatório do módulo das cargas igual a oito. A regra de Abegg obteve grande popularidade entre os físico-químicos (BEZERRA; SILVA, 2001).

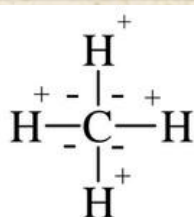
Diversos químicos concordavam com a ideia de Thomson de que uma ligação entre dois átomos ocorria quando um dos átomos doava um elétron ao outro. Essa teoria era frequentemente chamada de teoria positivo-negativa (pois como resultado da combinação de átomos, cada um passava a conter uma carga positiva ou negativa). Ela funcionava muitíssimo bem para a maioria dos compostos inorgânicos ou polares, como os resultantes da combinação de um metal com um não-metal (BEZERRA; SILVA, 2001).

Através da eletrólise com compostos iônicos, os químicos demonstraram experimentalmente a existência de átomos com carga positiva e átomos com carga negativa, parecendo verificado o postulado fundamental da teoria (BEZERRA; SILVA, 2001).

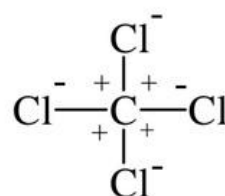
Entretanto, a aplicação da teoria positivo-negativa para compostos orgânicos, ou para compostos apolares, trazia sérias dificuldades. Átomos com cargas positivas e negativas deveriam existir nesses compostos, mas todas as tentativas para comprovar essa presença foram falhas. A imagem abaixo mostra exemplos de estruturas eletrônicas de acordo com a teoria positivo-negativa (BEZERRA; SILVA, 2001).



Cloreto de Hidrogênio



Metano



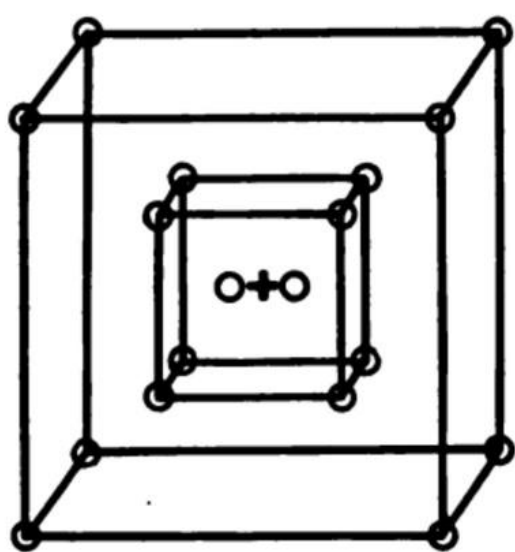
Tetracloreto de Carbono

2.4 - Teoria da Ligação de Lewis (Teoria do Par Eletrônico)

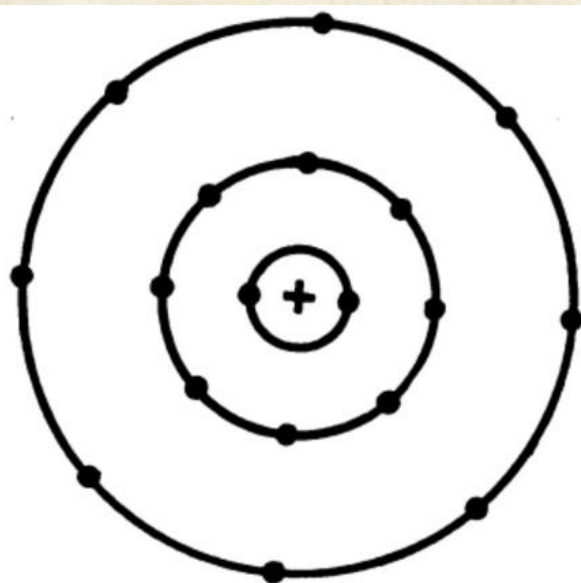
Em 1916, Lewis e também o cientista alemão Walther Kossel (1888-1956) propuseram novas teorias de ligação química independentemente. Os dois se basearam nas ideias de Richard Abbeg sobre a relação entre os elétrons e a valência dos átomos. Segundo Abbeg, existiam a valência positiva (o número de elétrons negativos frouxamente conectados no átomo) e a valência negativa (a capacidade de um átomo remover ou atrair um certo número de elétrons de um outro átomo (DRUDE, 1904 apud LAIDLER, 1993). Para Abbeg, todos os átomos tinham valências negativas e positivas, e a soma destas seria igual a oito (LAIDLER, 1993).

Kossel, baseando-se nessas ideias, propôs a chamada teoria das ligações polares, onde uma ligação química ocorreria devido à transferência de elétrons entre dois átomos, resultando em uma atração eletrostática entre eles (LAIDLER, 1993). Já Lewis, inspirado pelo trabalho de Abbeg, no mesmo ano, propôs que a ligação química deveria ser compreendida como a transferência ou compartilhamento de elétrons entre dois átomos, resultando em uma configuração eletrônica semelhante à de um gás nobre, com oito elétrons ao redor do núcleo atômico (COFFEY, 2008; IHDE, 1984).

Kossel e Lewis também foram inspirados pelas formas de representação dos átomos comuns na época, como mostra abaixo. Kossel utilizou a representação planetária, semelhante à utilizada por Bohr, para elucidar sua teoria de ligação. Já Lewis apresentou o modelo do “átomo cúbico”, no qual os elétrons ocupam os vértices de um cubo imaginário em torno do núcleo atômico, para explicar a valência e formação das ligações (IHDE, 1984).



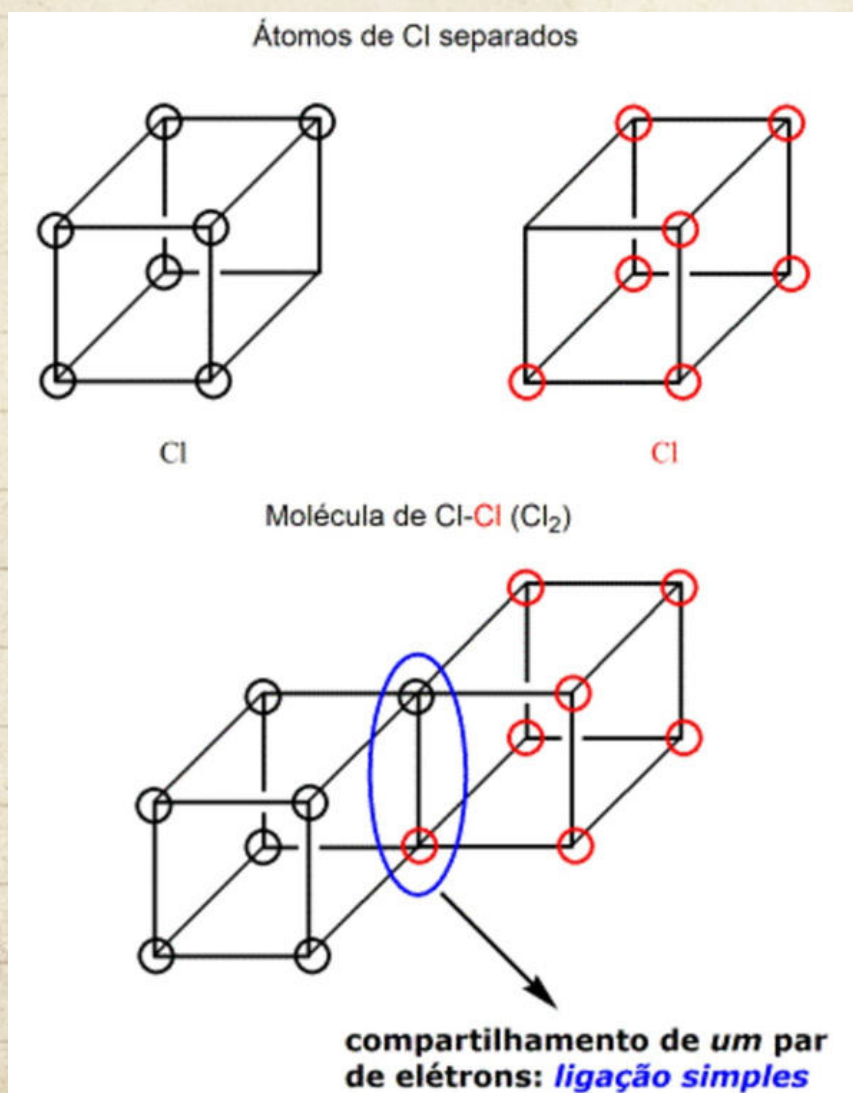
Lewis, 1916



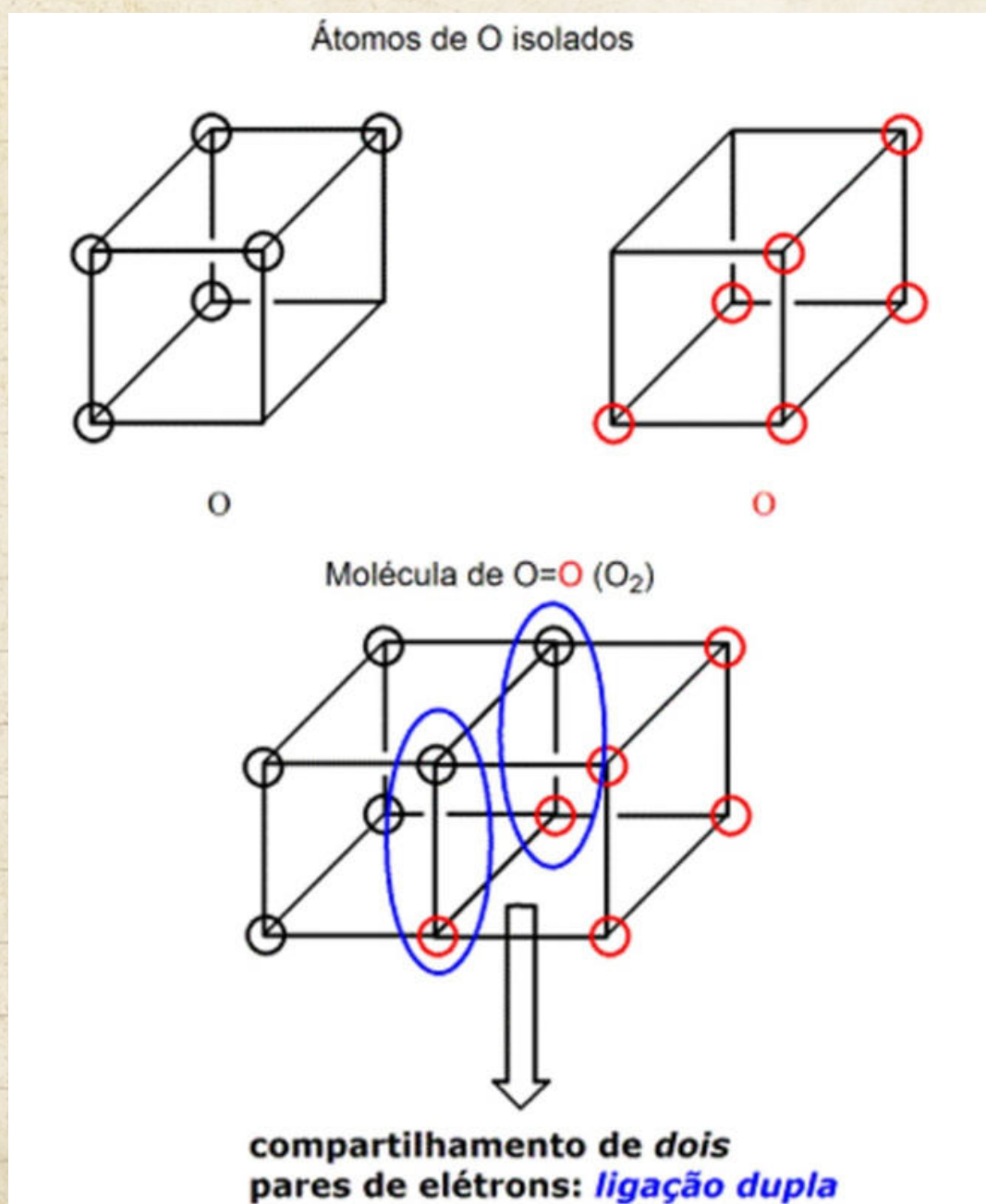
Kossel, 1916

Para Lewis, a ligação química ocorreria através do compartilhamento de elétrons ao se aproximarem os átomos cúbicos em relação aos seus vértices, arestas e faces. Ao compartilharem elétrons, os átomos deveriam adquirir a configuração eletrônica de um gás nobre (oito elétrons de valência). Usando esse modelo, Lewis tentou explicar as ligações químicas e também a disposição espacial dos átomos nas moléculas (LAIDLER, 1993).

Na mesma publicação de 1916, Lewis demonstrou como ocorre a ligação das moléculas do Cl_2 , onde somente os cubos externos são mostrados, pois são os elétrons de valência que determinam as ligações, completando sua camada externa com oito. A Figura abaixo mostra a estrutura química proposta por Lewis em sua publicação de 1916 para o gás cloro (Cl_2).

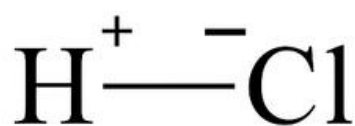


Já a figura abaixo, mostra a proposta de Lewis para a ligação da molécula de gás oxigênio (O_2), onde ocorre o compartilhamento de dois elétrons de valência, na mesma publicação de 1916. Este é um exemplo de uma ligação dupla entre os átomos.

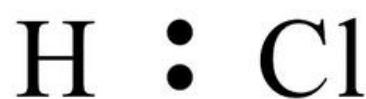


A teoria proposta por Lewis em 1916 foi a primeira teoria alternativa bem sucedida sobre a função dos elétrons na formação de uma ligação química apolar. Na teoria de Lewis sobre a ligação química, ele assumiu que em vez do elétron ser transferido completamente, como na teoria positivo-negativa, ocorria apenas uma transferência parcial, incompleta do elétron. Sendo assim, os átomos compartilhariam um par de elétrons entre si. A teoria de Lewis era mais ampla do que a teoria positivo-negativa, pois poderia ser aplicada eficientemente a compostos apolares, os quais não havia nenhuma indicação de formação de cargas nos átomos (BEZERRA, SILVA, 2001).

Lewis afirmava que sua teoria também poderia ser aplicada para explicar a formação de ligações em compostos polares, havendo uma certa carga residual. Para esse caso, em cada ligação formada, o par de elétrons ficaria mais próximo do átomo que possui maior força de atração. Assim, este átomo ficaria aparentemente negativo e o outro pareceria positivo, como mostra a figura abaixo. Dessa forma, a teoria positivo-negativa seria somente um caso especial da teoria de Lewis, que seria uma teoria mais completa (BEZERRA, SILVA, 2001).



(a)



(b)

Em 1916, os químicos reconheceram que muitos compostos possuíam um número par de elétrons externos (elétrons de valência). A tabela abaixo lista alguns exemplos (BEZERRA, SILVA, 2001).

Número de elétrons de valência em um átomo	Número de elétrons de valência na molécula
N = 5; H = 1	CH ₄ = 8
C = 4; H = 1	CH ₄ = 8
C = 4; O = 6	CO ₂ = 16
S = 6; O = 6	SO ₃ = 24
C = 4; Cl = 7	CCl ₄ = 32

2.5 - Teoria da Repulsão dos Pares de Elétrons Livres (Modelo VSEPR)

Em 1940, o químico inglês Nevil Sidgwick (1873-1952) e o químico Hebert Marcus Powell (1906-1991) fizeram uma revisão sobre as estruturas das moléculas conhecidas até o momento e sugeriram que a geometria poderia ser prevista através do número de pares de elétrons na camada de valência do átomo central. Em 1957, o químico britânico Ronald James Gillespie (1924-2021) e o químico australiano Ronald Nyholm (1917-1971) repensaram a Teoria de Sidgwick e Powell, para a previsão das estruturas moleculares e dos ângulos de ligação a VSEPR (Valence Shell Electron Pair Repulsion Theory) (KOTZ, 2005).

A VSEPR busca determinar qual a orientação mais estável dos pares eletrônicos em volta de um átomo central em uma molécula, prevendo a sua geometria. Segundo a teoria, os pares de elétrons da camada de valência (que estão carregados negativamente), permanecem separados, diminuindo as energias de repulsões existentes. A VSEPR ampliou a teoria da ligação química de Lewis e acrescentou as regras para explicar os ângulos de ligação entre o átomo central e os átomos ligantes (KOTZ, 2005).

Para explicar melhor a VSEPR, podemos determinar as geometrias moleculares utilizamos o modelo geral AX_nE_m para a identificação do átomo central, dos pares isolados e os átomos ligantes. A letra A representa o átomo central, a letra X representa o átomo ligante, a letra E um par isolado, já n e m são os índices que representam a quantidade de cada ligante e par isolado. Exemplo: a molécula do cloreto de berílio ($BeCl_2$), que contém um átomo central, dois átomos ligados e nenhum par isolado, sendo assim uma espécie do tipo AX_2 . (KOTZ, 2005).

Em alguns casos, como na molécula da amônia (NH_3), espécie do tipo AX_3E , temos quatro pares de elétrons ligados ao átomo central de nitrogênio, e esperava-se que a geometria fosse do tipo tetraédrico, no entanto a geometria molecular descrita é pirâmide trigonal, pois a geometria molecular é o arranjo dos espaços do átomo central e dos átomos ligados diretamente a ele, ou seja, os pares isolados devem ser considerados mesmo não sendo incluído na descrição da forma da molécula ou do íon.

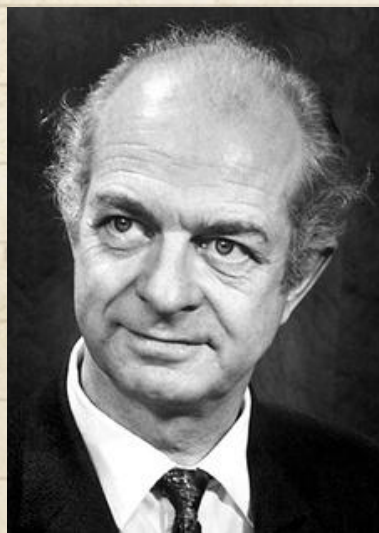
A tabela abaixo mostra os tipos de geometria molecular e também hibridização associada a elas.

Tipo de Molécula ou Íon	Forma Geométrica	Hibridização Associada
AX_2	Linear	sp
AX_3	Trigonal Plana	sp^2
AX_2E	Angular	sp^2
AX_4	Tetraédrica	sp^3
AX_3E	Piramidal	sp^3
AX_2E_2	Angular	sp^3
AX_5	Bipiramidal Trigonal	sp^3d
AX_4E	Tetraédrica Irregular (Gangorra)	sp^3d
AX_3E_2	Forma "T"	sp^3d
AX_2E_3	Linear	sp^3d
AX_6	Octaédrica	sp^3d^2
AX_5E	Piramidal de Base Quadrada	sp^3d^2
AX_4E_2	Quadrado Planar	sp^3d^2

2.6 - Teoria da Ligação de Valência (TLV)

As décadas de 1930 e 1940 viram o desenvolvimento da Teoria da Ligação de Valência (TLV) e da Teoria do Orbital Molecular (TOM). Linus Pauling (1901-1994) foi um dos cientistas interessados em mecânica quântica para explicar as ligações químicas. O cientista recebeu um bolsa de pesquisa para estudar na Europa, onde teve contato com Arnold Sommerfeld (1868-1951), Niels Bohr (1885-1962), Walter Heitler (1904-1981) e Fritz London (1900-1954), sendo os últimos que apresentaram o estudo de tratamento da molécula de hidrogênio por mecânica quântica (PATROCINIO, et al, 2020).

Quando retornou aos Estados Unidos, Pauling direcionou seus estudos para ligações químicas propondo a TLV, que introduziu esses conceitos quânticos como: geometrias moleculares em termos de superposição, ressonância e hibridização de orbitais. Contudo, sem uma abordagem complexa da matemática. Para ele, as ligações químicas ocorriam por superposição de orbitais atômicos ocupados por elétrons de spins opostos, sendo assim uma teoria intermediária para a teoria de Lewis e os conceitos da mecânica quântica (PATROCINIO, et al, 2020).



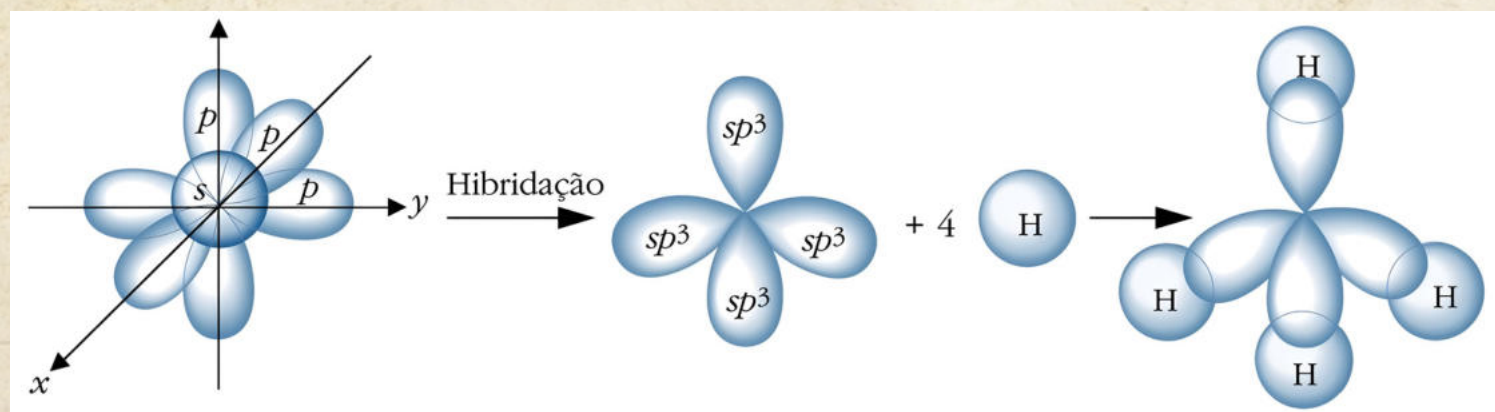
Químico quântico e bioquímico Linus Pauling.

A TLV foi a primeira teoria que introduziu conceitos da mecânica quântica desenvolvida para a ligação química. A linguagem introduzida por ela, envolvendo conceitos como emparelhamento de spins, superposição de orbitais, ligação σ , ligação π e hibridização é bastante utilizada na química, especialmente na descrição das propriedades e das reações dos compostos orgânicos. Na teoria, considera-se que uma ligação é formada quando um elétron em um orbital atômico de um átomo emparelha o seu spin com o de um elétron de spin oposto em um orbital atômico de outro átomo (SILVA, 2020).

A base conceitual da teoria da ressonância estava definida, permitindo a explicação de diversos fenômenos químicos com fundamento na movimentação das estruturas eletrônicas e na dinâmica das ligações dentro dessas estruturas. Na aplicação da teoria da ressonância à mecânica quântica, se for possível descrever uma molécula (ou outro sistema) por meio de duas ou mais estruturas eletrônicas com energias aproximadamente equivalentes e que satisfaçam determinadas condições, nenhuma dessas estruturas, isoladamente, pode ser considerada como a representação exata do estado fundamental da molécula (SILVA, 2020).

Em vez disso, o estado real da molécula é melhor descrito como uma combinação dessas estruturas, resultando em uma configuração híbrida. Esse fenômeno confere à molécula maior estabilidade, uma vez que seu conteúdo energético é menor do que seria caso adotasse qualquer uma das estruturas individualmente. O processo pelo qual a molécula alterna entre essas diferentes configurações é chamado de ressonância, e a energia associada à sua estabilização é conhecida como energia de ressonância (SILVA, 2020).

A Figura abaixo traz uma descrição via TLV para a molécula de metano (CH_4) através da combinação de três orbitais p e um orbital s, para formar quatro orbitais híbridos sp^3 e a representação da interpenetração do orbital $1s$ de quatro átomos de hidrogênio com os orbitais sp^3 do carbono, para formar o metano (CH_4). Vale ressaltar que além da sp^3 existem outros tipos de hibridização entre orbitais.



2.6 - Teoria dos Orbitais Moleculares (TOM)

A TOM (segunda teoria baseada na mecânica quântica), foi desenvolvida por Friedrich Hund (1896-1997), Robert Mulliken (1896-1986) e outros cientistas a partir da determinação de espectros moleculares e aprofundamento de abordagens matemáticas. A teoria definia que a ligação química entre átomos podia ocorrer pela combinação de orbitais atômicos descritos por funções de onda, gerando orbitais moleculares de energia menor do que os dos orbitais atômicos de origem. A TOM recebeu maior notoriedade por seus cálculos e também por conseguir explicar moléculas mais complexas (PATROCINIO, et al, 2020).

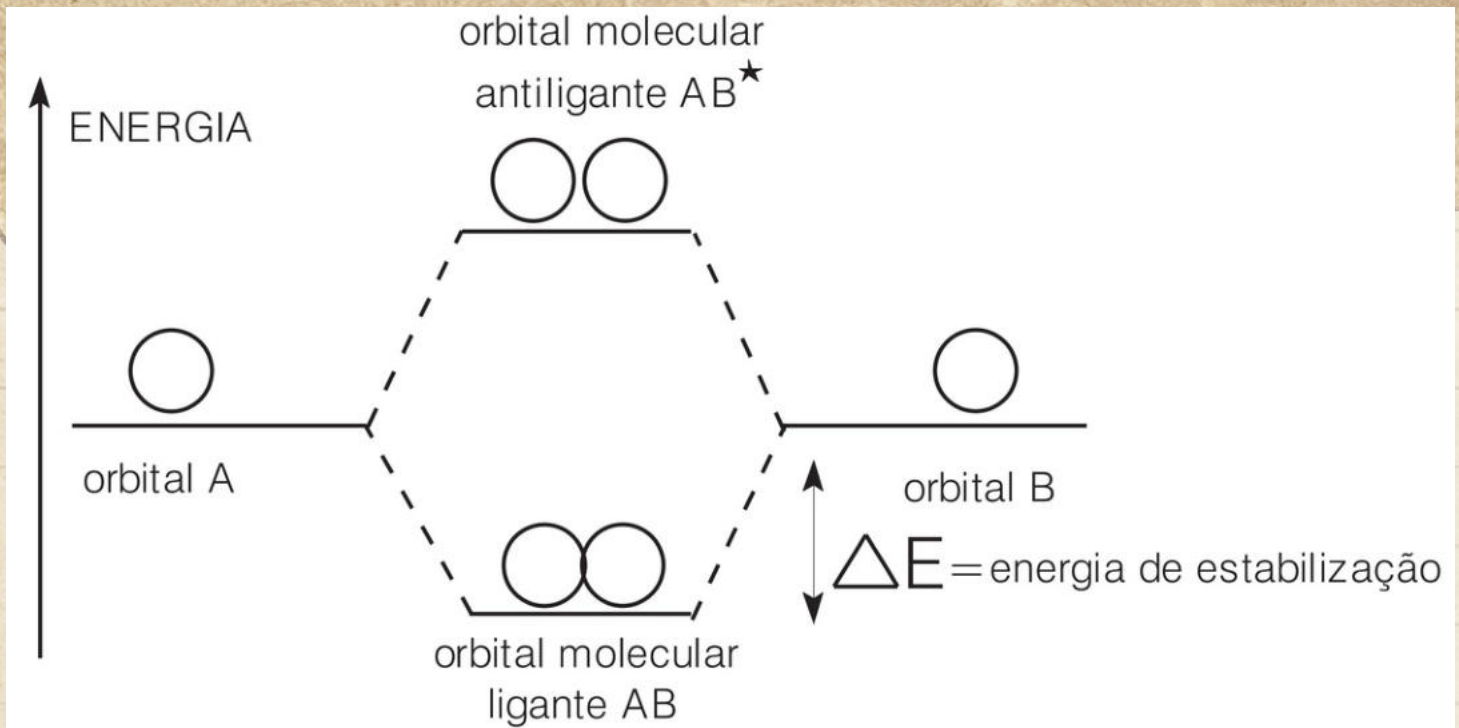
De maneira geral, um orbital molecular de uma molécula AB (Ψ_{AB}) pode ser descrito por uma combinação linear (soma ou diferença) dos orbitais atômicos localizados em A e em B, respectivamente ($\Psi_{AB} = c_A \Psi_A \pm c_B \Psi_B$). Essa combinação dos orbitais pode ocorrer em proporções variáveis, expressas pelos coeficientes c_A e c_B . Quando os orbitais são equivalentes, como os orbitais 1s na molécula de H_2 , esses coeficientes são iguais, isto é, $c_A = c_B$. Os coeficientes diferenciam-se cada vez mais à medida que aumenta a diferença de energia entre os orbitais (TOMA. 1997).

Quando $c_A \gg c_B$, a participação do Ψ_A é dominante e o orbital molecular Ψ_{AB} se assemelha a Ψ_A e vice-versa. Isso quer dizer que os elétrons não são compartilhados igualmente, podendo ficar a maior parte do tempo em A ou em B, dependendo dos valores relativos de c_A e c_B . Isso está relacionado com a diferença de eletronegatividade entre os elementos químicos participantes (TOMA. 1997).

Na mecânica quântica, as energias são calculadas por meio da equação de Schrödinger, cuja representação genérica é do tipo $H\Psi_{AB} = E\Psi_{AB}$, sendo H, conhecido como operador hamiltoniano, uma expressão matemática dos termos energéticos da molécula, englobando por exemplo a energia cinética dos elétrons, a atração dos núcleos pelos elétrons de ligação, a repulsão entre os elétrons e a repulsão internuclear (TOMA. 1997).

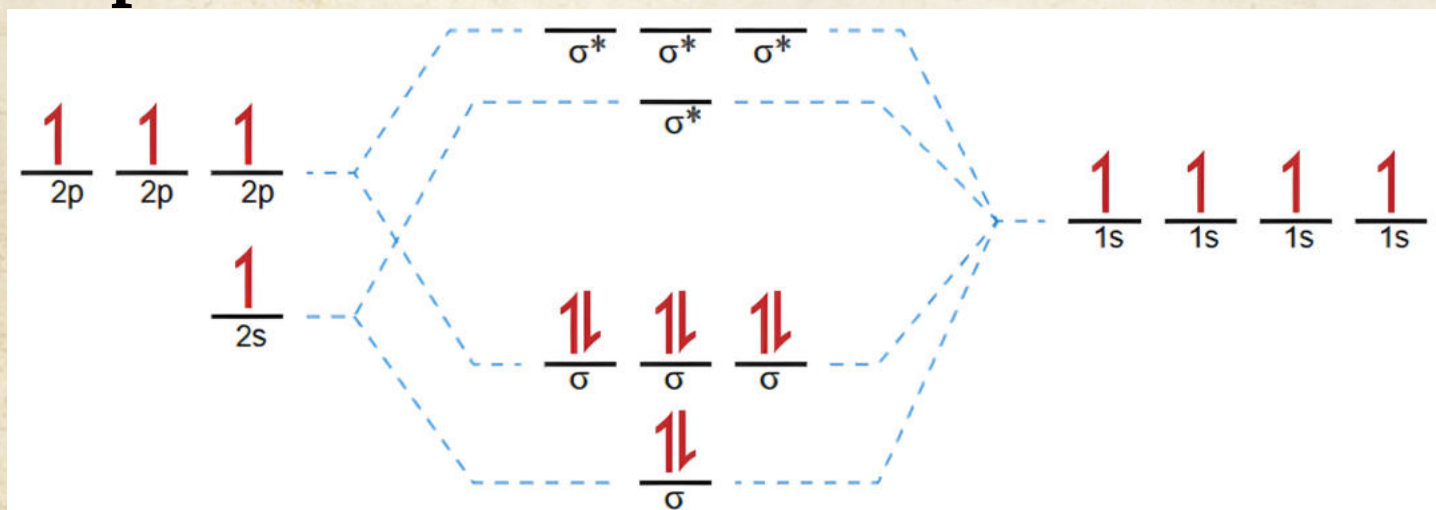
A solução da equação de Schrödinger sempre leva a dois valores de energia, E_+ e E_- , que estão associados às combinações, por soma ou diferença dos orbitais atômicos (TOMA. 1997).

A solução E_+ , de menor energia, provém da combinação dos orbitais atômicos com o mesmo sinal, formando um orbital molecular denominado ligante, levando à estabilização da molécula. A solução E_- provém da combinação dos orbitais atômicos com sinais opostos, produzindo um orbital molecular de maior energia denominado antiligante. Uma ilustração desses orbitais pode ser visualizada na figura da próxima página (TOMA. 1997).



O diagrama de energia dos orbitais moleculares indica que a formação da ligação química está relacionada à estabilização da molécula, que é proporcionada pelo preenchimento do orbital ligante (menor energia). Quando temos elétrons nos orbitais antiligantes (maior energia), diminuimos essa estabilização (TOMA. 1997).

A figura abaixo traz uma descrição via TOM para a molécula de metano (CH_4), sendo cada seta de cor vermelha a representação de um elétron em seu respectivo orbital.



Percebe-se na imagem que há um elétron do carbono em 2s e três elétrons em 2p, contudo, pode-se considerar que acontece a hibridização ou hibridação entre os orbitais s e p do carbono para formar quatro orbitais sp^3 , que interpenetram o orbital 1s de quatro átomos de hidrogênio para formar o metano (CH_4).

2.7 - Teoria do Loge

No final da década de 1950 os únicos métodos de cálculos químico quânticos existentes eram o método da ligação de valência e o método dos orbitais moleculares de Huckel. A década de 1950 marcou o início da aplicação da mecânica ondulatória na Química e foi nesse período que o físico francês Raymond Daudel (1920-2006) iniciou seus estudos sobre a natureza da ligação química.



Físico francês Raymond Daudel.

Em 1952 Daudel definiu a densidade diferencial de elétrons, grandeza calculada a partir das funções de onda que representam os orbitais atômicos e que poderia ser avaliada experimentalmente por técnicas de difração de nêutrons e de elétrons (SANDORFY, 1985). Essa definição foi uma importante contribuição de Daudel para o estudo da ligação química.

Em 1953, Daudel fez o que é considerada sua maior contribuição na Química Quântica, ele definiu o “Loge” como sendo o espaço onde existe alta probabilidade de encontrar um número “n” de elétrons. Daudel usava a probabilidade próxima a 90%. Dentre as teorias que procuram descrever a ligação química, a Teoria do Loge é a mais utilizada quando se aplica a Teoria da Informação no estudo de moléculas (NALEWAJSK, 2003).

Em seu artigo "About the Nature of the Chemical Bond" (1992), Daudel relaciona o Loge para dois elétrons com spins contrários à densidade eletrônica entre dois núcleos e encontra uma relação semelhante à lei de Boyle-Mariotte para os gases. Ele destaca que esse fato não deve ser coincidência por que nuvens de elétrons podem ser tratadas como gases.

Em seu livro "Quantum Theory of the Chemical Bond" (1974) (DAUDEL, 1974), Daudel descreve a Teoria do Loge, suas definições, fundamentos e todo o formalismo matemático necessário inclusive para as funções de onda associadas ao Loge, além de aplicações para moléculas e íons com as implicações na reatividade das espécies.

É importante destacar que a Teoria do Loge surgiu do grupo ao qual pertencia o físico Louis de Broglie, descobridor da dualidade onda-partícula e ganhador do Prêmio Nobel de Física de 1929 e que segundo Adrien Vila-Valls em sua tese de doutorado intitulada “Louis de Broglie et la diffusion de la mécanique quantique en France (1925-1960)” (2012) cabia à Raymond Daudel a aplicação da Mecânica Ondulatória à Química (Pág. 196).

As ideias originadas no grupo de Louis de Broglie se espalharam pelo mundo e chegaram ao Brasil. O Prof. Daudel foi orientador no doutorado do Prof. Milan Trsic (1937-2020) que foi professor do Instituto de Química de São Carlos da Universidade de São Paulo–USP.

Trsic formou diversos mestres e doutores sempre atuando na Química Teórica através do desenvolvimento de métodos de cálculo e aplicações a diversos tipos de sistemas atômicos e moleculares.



Professor Milan Trsic.

Referências

ABRANTES, P. C. C. Imagens de natureza e imagens de ciência. Campinas: Papirus, 1998.

BENSAUDE-VINCENT, B.; STENGERS, I. História da química. Lisboa: Instituto Piaget, 1992.

BEZERRA, A. S; SILVA, R. R. Ligações químicas: as primeiras teorias. Educación química. México. 12, (3) 179-183. 2001. Disponível em: <https://revistas.unam.mx/index.php/req/article/view/66346>. Acesso em: 10 de jul. 2024.

COFFEY, P. Cathedrals of science: The personalities and rivalries that made modern chemistry. Oxford University Press, 2008.

DAUDEL, Raymond. Quantum theory of the chemical bond. D. Reidel Publishing Company, 1974.

DAUDEL, Raymond. About the nature of the chemical bond. Journal of molecular structure. Theochem, v. 261, p. 113-114, 1992. Disponível em: [About the nature of the chemical bond \(inist.fr\)](#). Acesso em: 29 de jul. 2024.

FERNANDEZ, C.; MARCONDES, M. E. Concepções dos estudantes sobre ligação química. Química Nova na Escola, v. 24, p. 20-24, 2006. Disponível em: <http://qnesc.sbq.org.br/online/qnesc24/af1.pdf>. Acesso em: 26 de jul. 2024.

FILGUEIRAS, L. A. C. Gilbert Lewis e o centenário da teoria de ligação por par de elétrons. Química Nova na Escola, Vol. 39, No. 10, 1262-1268, 2016. Disponível em: <https://www.scielo.br/j/qn/a/MycQJGRnj35mmvQWcsFx7zD/> . Acesso em: 26 de jul. 2024.

IHDE, A. J. The development of the modern chemistry. New York: Dover publications, 1984.

JUSTI, R. S.; A afinidade entre as substâncias pode explicar as reações químicas? Química Nova na Escola. n.7, p.26-29, Maio, 1998.

Disponível em: <http://qnesc.sbq.org.br/online/qnesc07/historia.pdf>. Acesso em: 29 de jul. 2024.

KOTZ, John C. Química geral e reações químicas. São Paulo: Pioneira Thomson Learning, 2005.

LAIDLER, K. J. The world of physical chemistry. Oxford: Oxford University Press, 1993.

NALEWAJSKI, Roman F. Princípios de informação na teoria de loge. Chemical physics letters , v. 375, n. 1-2, p. 196-203, 2003. Disponível em:

<https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0009261403008029>. Acesso em: 04 de mar. 2025.

NAVARRO, M., FÉLIX, M., MILARÉ, T. A História da Química em livros didáticos do Ensino Médio. Revista Ciência, Tecnologia & Ambiente, v. 1, n. 1, 2015. Disponível em:

<https://www.revistacta.ufscar.br/index.php/revistacta/article/view/12>. Acesso em: 01 de dez. 2023.

PATROCÍNIO, Analouise Almeida do et al. O Desenvolvimento histórico do conceito de ligação química. Trabalho apresentado em anais do 20º Encontro Nacional de Ensino de Química (ENEQ Pernambuco). Anais de Recife (PE) UFRPE/UFPE, 2020. Disponível em: <https://www.even3.com.br/anais/enegpe2020/245145-o-desenvolvimento-historico-do-conceito-de-ligacao-quimica/>. Acesso em 29 de jul. 2024.

SANDORFY, C. Professor Raymond Daudel. Journal of Molecular Structure: THEOCHEM, v. 123, n. 3-4, p. 165-169, 1985.

SILVA, M. A. S. Teoria do orbital molecular: uma proposta de aplicação no ensino médio de química. 2020. 94 f. Dissertação (Programa de Mestrado Profissional em Química), Universidade Federal Rural de Pernambuco, Recife, 2020.

TOMA, H. E. Ligação química: abordagem clássica ou quântica?. Química Nova na Escola, v. 6, n. 2, p. 8-12, 1997. Disponível em: <http://qnesc.sbq.org.br/online/qnesc06/conceito.pdf>. Acesso em: 10 de jul. 2024.

VILA-VALLS, Adrien. Louis de Broglie et la diffusion de la mécanique quantique en France (1925-1960). 2012. Tese de Doutorado. Université Claude Bernard-Lyon I. Disponível em: [Louis de Broglie et la diffusion de la mécanique quantique en France \(1925-1960\) - TEL - Thèses en ligne \(hal.science\)](#). Acesso em: 29 de jul. 2024.